

## КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ОКСИДОВ

### $\text{YBaCu}_{2-x}\text{Me}_x\text{O}_{5+\delta}$ (Me = Fe, Co)

*Ёлохова А.А., Брюзгина А.В., Урусова А.С., Аксёнова Т.В., Черепанов В.А.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Настоящая работа посвящена изучению кристаллической структуры и свойств слоистых перовскитов на основе  $\text{YBaFeCuO}_{5+\delta}$  при 1000 °С на воздухе.

Синтез образцов для исследования был проведен по глицерин-нитратной технологии. Для синтеза использовали оксиды  $\text{Y}_2\text{O}_3$  (ИтО-В),  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  (ос.ч.) и  $\text{CuO}$  (ч.д.а.), карбонат бария  $\text{BaCO}_3$  (ос.ч.), оксалат железа  $\text{FeC}_2\text{O}_4 \times 2\text{H}_2\text{O}$  (ч.д.а.), металлические кобальт и железо. Металлические кобальт и железо получали восстановлением из соответствующих оксидов при 600 и 750 °С, соответственно, в токе водорода.

Отжиг образцов проводили при температуре 800 – 1000 °С на воздухе. Навески требуемых исходных компонентов, взятых в соответствующих стехиометрических количествах, растворяли в небольшом избытке разбавленной азотной кислоты при нагревании. Далее к раствору добавляли эквимольное количество глицерина и раствор выпаривали. Полученный сухой остаток медленно нагревали до температуры 900 – 1000 °С. Дальнейший обжиг образцов проводили в течение 120 часов, с последующим охлаждением до комнатной температуры со скоростью 100°/час, или закалкой на комнатную температуру, в зависимости от поставленных задач.

Для определения фазового состава образцы анализировали методом рентгеновской порошковой дифракции, с использованием дифрактометра Shimadzu в  $\text{CuK}\alpha$ -излучении ( $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ ). Съемку проводили в интервале углов  $10^\circ \leq 2\Theta \leq 100^\circ$  со скоростью от 1.0 до 0.02 градуса в минуту с выдержкой в точке от 1 до 10 секунд.

Идентификацию фаз осуществляли при помощи картотеки JCPDS и программного пакета “fpeak”. Параметры элементарных ячеек однофазных оксидов были рассчитаны в программе “Celref 3” и уточнены методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе “Fullprof 2016”.

Для определения области гомогенности в системе  $\text{YBaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{CuO}_{5+\delta}$  с  $0.0 \leq x < 1.0$  с шагом 0.1.

Рентгенографические данные для  $\text{YBaFeCuO}_{5+\delta}$  хорошо описывались в тетрагональной ячейкой типа  $a_p \times a_p \times 2a_p$ , с параметрами:  $a = 3.871 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.662 \text{ \AA}$ . Было установлено, что введение кобальта в подрешетку железа для состава  $\text{YBaFe}_{0.7}\text{Co}_{0.3}\text{CuO}_{5+\delta}$  приводит к незначи-

тельному уменьшению параметров  $a = 3.870 \text{ \AA}$ ,  $c = 7.636 \text{ \AA}$ , что связано с размерным эффектом ( $r_{\text{Fe}^{3+}} / r_{\text{Fe}^{4+}} = 0.785 / 0.725 \text{ \AA}$ , к.ч. = 6 и  $r_{\text{Co}^{3+}} / r_{\text{Co}^{4+}} = 0.61 / 0.53 \text{ \AA}$ , к.ч. = 6)[1].

Методом термогравиметрического анализа для незамещенного оксида  $\text{YBaFeCuO}_{5+\delta}$  получена зависимость кислородной нестехиометрии ( $\delta$ ) от температуры  $T = 25 - 1000 \text{ }^\circ\text{C}$  на воздухе. Абсолютное содержание кислорода ( $5+\delta$ ) в образце составило 5.02.

Температурная зависимость относительного линейного расширения сложных оксидов была измерена на dilatометре Netzsch DIL 402C в интервале температур  $25-1000 \text{ }^\circ\text{C}$  на воздухе. Из полученных данных были рассчитаны коэффициенты термического расширения. Для состава  $\text{YBaFeCuO}_{5+\delta}$  значение КТР составило  $13.7 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ . С введением кобальта в образец значения коэффициентов термического расширения незначительно возрастают.

1. Shannon R.D. Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides // Acta Cryst. 1976. V. 32. P. 751–767.

## **КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ФАЗ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В СИСТЕМЕ Gd – Sr – Fe – O**

*Зубаткина Л.В., Петрова А.В., Волкова Н.Е., Черепанов В.А.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

За последнее десятилетие общество стало потреблять значительно большее количество электроэнергии. Все возрастающие потребности стали причиной развития химии твердого тела, основными задачами которой являются синтез твердых веществ, изучение их физико-химических свойств, реакций с их участием и в конечном итоге создание материалов с заранее заданными свойствами.

Поэтому целью настоящей работы является исследование фазовых равновесий в системе Gd-Sr-Fe-O, а также изучение кристаллической структуры, кислородной нестехиометрии и физико-химических свойств индивидуальных соединений, образующихся в данной системе.

Синтез образцов проводили по стандартной керамической и глицерин-нитратной технологиям. Фазовый состав полученных оксидов контролировали рентгенографически. Определение параметров элементарных ячеек осуществляли с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе